

データ多様体の内在的リーマン空間への等長埋め込みと非線形次元削減への応用
Isometric embedding of data manifolds to intrinsic Riemann spaces and application to
Nonlinear dimensionality reduction

藤田 裕也[†]
Yuya Fujita

趙 晋輝[‡]
Jinhui Chao

1. はじめに

機械学習などの応用では多くの入力変数を持つ高次元空間を扱う必要がある。次元が大きくなるにつれ一般的には学習が困難になるので、次元の削減が求められる。また高次元データの多くは低次元の非線形な部分多様体にまとまっている場合が多いため、多様体上の幾何学特性を保存しながら低次元のユークリッド空間へ写像する多様体学習と非線形空間の次元削減が提案されている [1-4]。特に ISOMAP[1]ではデータ多様体上の測地線距離を MDS に適用し、[3]ではそれをリーマン空間の Exp 写像によって求めた。さらに、LOGMAP[4]は、データ多様体上のある一点における正規座標系を計算した。

しかし、多様体の位相や計量を保存したユークリッド空間への埋め込みは存在しないため、上記らの手法はあくまで近似であるのみならず、その埋め込みには煩雑な固有値問題の計算を要した。また、データ多様体上の Exp 写像や正規座標系の計算も非効率であった。

本研究では非線形な高次元データをリーマン多様体と仮定し、それを内在的リーマン空間としてのユークリッド空間への厳密かつ高速な等長埋め込み方式を提案する。さらに、二次曲面近似による計量の求め方、そして正規座標系のみならず直交測地座標系を含め、複数近傍にわたる大域座標系の計算法を示す。

2. 多様体とリーマン空間

2.1 多様体の定義

位相空間 M の任意の開集合 U から \mathbb{R}^n のある開集合 U' 上への連続可微分な 1-1 写像

$$f: U \rightarrow U'$$

が存在し、隣近傍の像の間の対応も連続可微分であるとき、 M は微分多様体であると定義される。

U 内の点 p は、 f によって

$$f: p \mapsto (x_1(p), \dots, x_n(p))$$

と写像される。これらの数 $x_1(p), \dots, x_n(p)$ を p の局所座標、 f を局所座標系と呼ぶ。

2.2 リーマン空間の定義

リーマン空間は、二点 (u^i) および $(u^i + du^i)$ 間の小距離 ds の平方が

$$ds^2 = g_{jk} du^j du^k \Leftrightarrow (du, du)_G, G = [g_{jk}]$$

で与えられる空間と定義される。 $G = (g_{jk})$ はリーマン計量といい、それは一般に座標 u の滑らかな関数である。

また、内在的なリーマン空間は、 (\mathbb{R}^n, G) と定義され、ユークリッド空間はその特例 $U = (\mathbb{R}^n, I)$ となる。リーマン空

間 $M = (\mathbb{R}^n, G(x))$ からリーマン空間 $N = (\mathbb{R}^m, G(y))$ への写像 $f: M \rightarrow N, y = f(x)$ は任意の x に対して

$$(dx, dx')_{G(x)} = (df(x), df(x'))_{G(y)} = (dy, dy')_{G(y)} \quad (1)$$

を満たすとき、 f を等長写像という。 f のヤコビアン D_f で

$$dy = D_f(x) dx, dy' = D_f(x) dx' \quad (2)$$

を代入すると、以下の局所等長写像の条件が求まる。

$$G(y) = (D_f(x))^T G(x) D_f(x) \quad (3)$$

2.3 測地線

リーマン空間中にある曲線 $u^i(t)$ が長さの極値を与えると、このような曲線をリーマン空間の測地線と呼ぶ。測地線は以下の式で表される。

$$E^i = \frac{d^2 u^i}{ds^2} + \Gamma_{jk}^i \frac{du^j}{ds} \frac{du^k}{ds} = 0$$

記号 Γ_{jk}^i はクリストッフエルの記号(Christoffel symbol)といい、以下の式で表される。

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{ia} \left(\frac{\partial g_{aj}}{\partial u^k} + \frac{\partial g_{ak}}{\partial u^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial u^a} \right)$$

2.4 リーマン正規座標系

リーマン空間上に基準点を置き、測地線と等距離線を用いることにより座標系を構築することができる。この座標系をリーマン正規座標系という [6]。しかし一般的なリーマン多様体において、一つの正規座標系で表すことができない。

3. 提案手法

既存手法のように、非線形なデータをユークリッド空間へ直接埋め込む限り正しい等長写像が得られない。

本研究では、まず複数の近傍へ分割の上で、内在的リーマン空間への局所等長写像を用いて、多様体の正確な等長埋め込みを求める。具体的に、各近傍に単純な射影によるユークリッド空間への写像と計量を計算するだけで、従来のような煩雑な固有値計算は必要としない。特に計量を高速に計算する方法を次節で示す。また、正規座標系に拘る必要もなく、内在的リーマン空間内において測地線と等距離線を組み合わせた測地線網を構築し、リーマン正規座標系を求める。この方法は LOGMAP に比べて容易で正確な計算が行える。また近傍間接続のしやすい直交座標系も示す。

4. 実験

4.1 空間曲面の 2 次元リーマン空間への埋め込み

以下の方程式で表される 3 次元空間内の曲面からランダムに 1000 点を生成し、最小二乗法を用いて、生成した点群から二次曲面のパラメータを求めた。

[†] 中央大学大学院 理工学研究科 情報工学専攻

[‡] 中央大学 理工学部 情報工学科

$$S_1: z = \frac{1}{6}\{(x+1)^2 + y^2 - 1\} (x < 0) \quad (a),$$

$$z = -\frac{1}{6}\{(x-1)^2 + y^2 + 1\} (x \geq 0) \quad (b)$$

$$S_2: z = 2x^2 - y^2$$

表 1: 推定された曲面のパラメータ

曲面	実際の値		推定値	
	a_1	a_2	a_1	a_2
$S_1(a)$	0.1667	0.1667	0.1664	0.1668
$S_1(b)$	-0.1667	0.1667	-0.1656	0.1662
S_2	2	-1	2.0000	-1.000

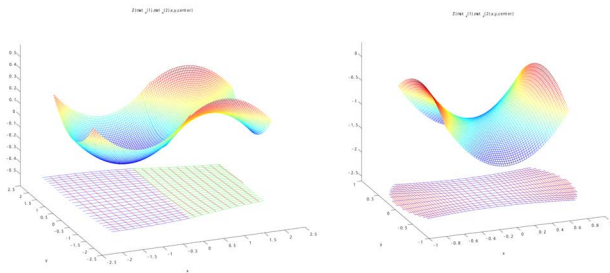


図 1 曲面 S_1

図 2 曲面 S_2

次に、局所写像をxy平面への射影し計量を求める。次のような \mathbb{R}^3 上の曲面Sを考える、

$$S: x_3 = \mathbf{y}^T A \mathbf{y}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} a_1 & a_3 \\ a_3 & a_2 \end{pmatrix}$$

Sを2次元リーマン多様体Mの開近傍と仮定すると、 \mathbb{R}^2 の開近傍 U' への連続な1-1写像を次のように定義できる。

$$f: S \rightarrow U', f: \mathbf{y} \mapsto \mathbf{x}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ f(\mathbf{y}) \end{pmatrix}$$

計量は式(3)を用いて以下の式になる。

$$G(\mathbf{y}) = I_2 + 4A\mathbf{x}\mathbf{x}^T A^T = \begin{pmatrix} 4a_1^2 x^2 + 1 & 4a_1 a_2 xy \\ 4a_1 a_2 xy & 4a_2^2 y^2 + 1 \end{pmatrix}$$

5. リーマン座標系の構築

M上で基準となる測地線を1つ選び、測地線間隔が $n(n \geq 0)$ 毎となる各点をマークする。マークした各点において基準となる測地線に直交する測地線を求め、同じく測地線間隔が n 毎となる点をマークする。ここでマークした点が測地線と等距離線の交点(格子点)となり、リーマン正規座標系における座標値となる。(図5,6)

また、各近傍における測地線による局所直交座標系と、大域座標系は図3,4に示している。

6. 結論と今後の課題

今までの多様体学習では、データ集合が持つリーマン幾何学的構造を保存する埋め込みが実現できなかったが、本研究では、入力データから計量を求め、内在的リーマン空間への埋め込みを行うことによって、初めてリーマン計量を保存する等長な埋め込みに成功した。また、本方式は計算が簡単であり、高速な計量計算法も示した。そして、内在的リーマン空間内での正規座標系と直交座標系も求めた。

今後、本方式の効率化と実データへの応用が予定である。

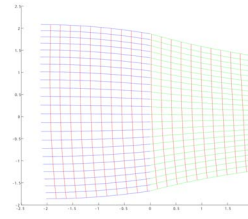


図 3 S_1 のリーマン直交座標系

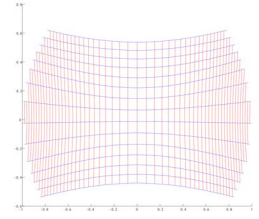


図 4 S_2 のリーマン直交座標系

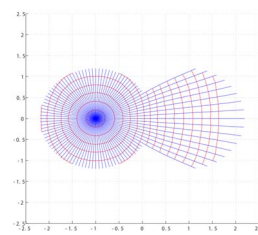


図 5 S_1 のリーマン正規座標系

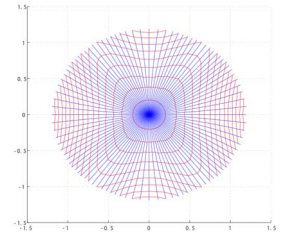


図 6 S_2 のリーマン正規座標系

参考文献

- [1] J. B. Tenenbaum, V. de Silva, J. C. Langford, "A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction", Science, vol.290, pp2319-2322, (2000).
- [2] S. T. Roweis, L. K. Saul, "Nonlinear Dimensionality Reduction by Locally Linear Embedding", Science, vol.290, pp2323-2326, (2000).
- [3] A. Goh "Riemann manifold clustering and dimensionality reduction for vision-based analysis", Machine Learning for Vision-based motion analysis, pp.27-53, (2011)
- [4] A. Brun, C.-F. Westin, M. Herberthson, H. Knutsson, "Fast Manifold Learning Based on Riemannian Normal Coordinates", Proceedings of the SCIA'05, pp920-929, (2005).
- [5] B. F. Schutz, "物理学における幾何学的方法" (1990).
- [6] 大島 哲, "リーマン正規座標系を用いた色空間における色差保存写像の構築と色弱補正方式への応用", 2014年度中央大学大学院博士論文, (2014).